

# Obsah

Předmluva	i
Obsah	iii
Seznam hlavních symbolů	ix
<b>1 Úvodní informace o odhadových metodách a o chybách odhadnutých veličin</b>	<b>1-1</b>
1.1 Základní typy odhadových metod	1-1
1.1.1 Teoreticky podložené odhadové metody	1-2
1.1.2 Odhadové metody založené na teorému korespondujících stavů	1-2
1.1.3 Příspěvkové odhadové metody	1-5
1.1.4 Empirické korelace	1-8
1.2 Výpočet chyby odhadnuté veličiny	1-9
1.2.1 Úvod	1-9
1.2.2 Složky celkové chyby	1-9
1.2.3 Teoretické základy	1-11
1.2.4 Výpočet zprostředkované chyby	1-13
1.3 Kompendia o odhadových metodách	1-16
1.4 Datové kompilace	1-19
1.4.1 Datové kompilace vydané knižně	1-19
1.4.2 Elektronické verze datových kompilací	1-23
1.5 Literatura	1-25
<b>2 Některé základní molekulární a látkové veličiny</b>	<b>2-1</b>
2.1 Dipólový moment	2-1
2.1.1 Úvod	2-1
2.1.2 Odhadové metody	2-3
2.1.3 Zdroje dat	2-3
2.2 Molární refrakce	2-3
2.2.1 Úvod	2-3
2.2.2 Odhadové metody	2-4
2.2.3 Zdroje dat	2-7
2.3 Parachor	2-7
2.3.1 Úvod	2-7
2.3.2 Odhadové metody	2-7
2.3.3 Zdroje dat	2-8
2.4 Gyráční poloměr	2-8
2.4.1 Úvod	2-8
2.4.2 Odhadové metody	2-9
2.4.3 Zdroje dat	2-9
2.5 Teplota tání	2-10
2.5.1 Úvod	2-10
2.5.2 Odhadové metody	2-11
<i>Jobackova metoda</i>	2-11
<i>Grainova a Lymanova metoda</i>	2-13



<i>Pravidlo tří teplot</i> . . . . .	2-14
2.5.3 Zdroje dat . . . . .	2-14
2.6 Teplota varu . . . . .	2-14
2.6.1 Úvod . . . . .	2-14
2.6.2 Odhadové metody . . . . .	2-15
<i>Jobackova metoda</i> . . . . .	2-16
2.6.3 Zdroje dat . . . . .	2-16
2.7 Literatura . . . . .	2-17
<b>3 Odhadové metody pro stavové chování kapalin a plynů</b> . . . . .	<b>3-1</b>
3.1 Diagram $p-V_m-T$ . . . . .	3-1
3.2 Kritické veličiny . . . . .	3-5
3.2.1 Kritický bod a jeho vlastnosti . . . . .	3-5
3.2.2 Odhad kritických veličin . . . . .	3-7
3.2.2.1 Příspěvkové metody . . . . .	3-7
<i>Lydersenova metoda</i> . . . . .	3-8
<i>Jobackova metoda</i> . . . . .	3-9
<i>Ambroseho metoda</i> . . . . .	3-11
<i>Zhodnocení příspěvkových metod</i> . . . . .	3-15
3.2.2.2 Závislost kritických veličin na velikosti molekuly v homologických řadách . . . . .	3-16
3.2.2.3 Vliv rozvětvení řetězce na hodnoty kritických veličin uhlovodíků . . . . .	3-17
3.2.2.4 Metody vycházející z teorému korespondujících stavů . . . . .	3-20
3.2.3 Kritické a pseudokritické veličiny směsí . . . . .	3-21
3.2.4 Zdroje dat . . . . .	3-22
3.3 Hustota kapalin . . . . .	3-23
3.3.1 Úvod . . . . .	3-23
3.3.2 Odhadové metody pro hustotu kapaliny podél křivky nasycení . . . . .	3-23
<i>Rackettova rovnice</i> . . . . .	3-24
<i>Spencerova a Dannerova metoda</i> . . . . .	3-25
<i>Campbellova a Thodosova metoda</i> . . . . .	3-29
<i>Metoda COSTALD</i> . . . . .	3-32
<i>Rozšíření na nasycené kapalné směsi</i> . . . . .	3-34
3.3.3 Hustota stlačené kapaliny . . . . .	3-39
<i>Zobecněná Taitova rovnice</i> . . . . .	3-40
3.3.4 Zdroje dat o hustotě kapalin . . . . .	3-44
3.4 Stavové chování plynů a par . . . . .	3-45
3.4.1 Viriální stavová rovnice . . . . .	3-46
3.4.1.1 Odhadové metody pro druhý viriální koeficient . . . . .	3-48
<i>Tsonopoulosova metoda</i> . . . . .	3-48
<i>Tsonopoulosova metoda - rozšíření pro směsi</i> . . . . .	3-50
<i>McCannova-Dannerova metoda</i> . . . . .	3-52
3.4.1.2 Odhadové metody pro třetí viriální koeficient . . . . .	3-55
3.4.1.3 Zdroje dat . . . . .	3-56
3.4.2 Kubické stavové rovnice . . . . .	3-56



	<i>Redlichova-Kwongova rovnice</i>	3-57
	<i>Redlichova-Kwongova-Soaveho rovnice</i>	3-58
	<i>Pengova-Robinsonova rovnice</i>	3-60
3.4.3	Složitější stavové rovnice	3-61
	<i>Leeova-Keslerova rovnice</i>	3-62
3.5	Literatura	3-65
<b>4</b>	<b>Fyzikálně chemické veličiny vztahované k mezi sytosti</b>	<b>4-1</b>
4.1	Tlak nasycených par	4-1
4.1.1	Úvod	4-1
4.1.2	Odhadové metody	4-1
	<i>Leeova-Keslerova metoda</i>	4-2
	<i>Riedelova metoda</i>	4-2
	<i>Metoda AMP</i>	4-4
	<i>Doporučení pro výběr odhadové metody</i>	4-6
4.1.3	Zdroje dat	4-7
4.2	Výparná entalpie	4-8
4.2.1	Úvod	4-8
4.2.2	Odhadové metody	4-8
	<i>Nepřímé metody stanovení výparné entalpie (rovnice Antoineova, Wagnerova, Coxova)</i>	4-8
	<i>Generalizované metody</i>	4-10
	<i>Metody pro odhad výparné entropie</i>	4-10
	<i>Ducrosova příspěvková metoda</i>	4-11
4.2.3	Zdroje dat	4-15
4.3	Tepelná kapacita kapalin	4-16
4.3.1	Úvod	4-16
4.3.2	Odhadové metody	4-17
	<i>Rowlinsonova metoda</i>	4-17
	<i>Růžičkova a Domalskiho metoda</i>	4-18
4.3.3	Zdroje dat	4-29
4.4	Acentrický faktor	4-29
4.4.1	Úvod	4-29
4.4.2	Odhadové metody	4-30
	<i>Edmisterova metoda</i>	4-30
	<i>Leeova-Keslerova metoda</i>	4-31
4.4.3	Zdroje dat	4-31
4.5	Literatura	4-31
<b>5</b>	<b>Termochemické veličiny ideálního plynu</b>	<b>5-1</b>
5.1	Úvod	5-1
5.1.1	Slučovací entalpie	5-1
5.1.2	Molární tepelné kapacity, entalpie	5-2
5.1.3	Veličiny spojené s entropií	5-3
5.1.4	Přesnost experimentálních hodnot termochemických veličin	5-4
5.2	Odhadové metody	5-5



5.2.1	Odhad molární tepelné kapacity Bensonovou metodou	5-6
5.2.2	Odhad slučovací entalpie Bensonovou metodou	5-6
5.2.3	Odhad entropických veličin Bensonovou metodou	5-9
5.2.4	Příklady použití Bensonovy metody	5-21
5.3	Zdroje dat	5-26
5.4	Literatura	5-28
<b>6</b>	<b>Transportní vlastnosti a povrchové napětí</b>	<b>6-1</b>
6.1	Viskozita plynů a kapalin	6-1
6.1.1	Úvod	6-1
6.1.2	Odhadové metody pro plyny	6-4
6.1.2.1	Viskozita plynu při normálním tlaku	6-4
	<i>Chapmanova - Enskogova metoda</i>	6-4
	<i>Chapmanova - Enskogova metoda pro polární látky</i>	6-7
	<i>Chungova metoda</i>	6-8
	<i>Stielova a Thodosova metoda</i>	6-9
6.1.2.2	Viskozita plynu při vyšším tlaku	6-10
	<i>Jossiho metoda pro nepochární látky</i>	6-11
	<i>Stielova a Thodosova metoda pro polární látky</i>	6-11
6.1.2.3	Viskozita směsi plynů za normálního tlaku	6-12
	<i>Wilkeho metoda</i>	6-13
	<i>Deanova a Stielova metoda</i>	6-13
6.1.2.4	Viskozita směsi plynů při vyšším tlaku	6-14
6.1.3	Odhadové metody pro kapaliny	6-15
	<i>Orrickova a Erbarova metoda</i>	6-15
	<i>Letsouova a Stielova metoda</i>	6-16
	<i>Tejova metoda</i>	6-17
6.1.4	Závislost viskozity kapalných směsí na složení	6-17
6.1.5	Zdroje dat	6-18
6.2	Tepelná vodivost plynů a kapalin	6-18
6.2.1	Úvod	6-18
6.2.2	Odhadové metody pro plyny	6-20
6.2.2.1	Tepelná vodivost plynu při normálním tlaku	6-20
	<i>Euckenovy korelace</i>	6-21
	<i>Chungova metoda</i>	6-22
6.2.2.3	Tepelná vodivost plynů při vyšším tlaku	6-24
6.2.2.4	Tepelná vodivost směsi plynů při normálním tlaku	6-25
	<i>Masonova a Saxenova metoda</i>	6-25
	<i>Lindsayova a Bromleyova metoda</i>	6-26
6.2.3	Odhadové metody pro kapaliny	6-27
	<i>Satova metoda</i>	6-27
	<i>Tejova metoda</i>	6-27
	<i>Nagvekarova a Daubertova metoda</i>	6-28
6.2.4	Zdroje dat	6-31
6.3	Difúzní koeficienty plynů a kapalin v binárních systémech	6-31
6.3.1	Úvod	6-31



6.3.2	Odhadové metody pro plyny při nízkém tlaku	6-33
6.3.2.1	Binární směsi plynů	6-33
	<i>Chapmanova a Enskogova metoda</i>	6-33
	<i>Wilkeho a Leeova metoda</i>	6-34
	<i>Vliv teploty na difúzní koeficient</i>	6-35
6.3.2.3	Difúze ve vícesložkové směsi plynů	6-35
6.3.3	Odhadové metody pro kapaliny	6-35
6.3.3.1	Odhad difúzního koeficientu složky v roztoku při nekonečném zředění	6-36
	<i>Haydukova a Laudieho metoda</i>	6-36
	<i>Scheibelova metoda</i>	6-37
6.3.3.2	Závislost binárních difúzních koeficientů na složení	6-37
6.3.4	Zdroje dat	6-38
6.4	Povrchové napětí	6-38
6.4.1	Úvod	6-38
6.4.2	Odhadové metody pro povrchové napětí čistých látek	6-39
	<i>Macleodova-Sudgenova metoda</i>	6-39
	<i>Metoda založená na teorému korespondujících stavů</i>	6-40
6.4.3	Odhadové metody pro povrchové napětí kapalných směsí	6-40
6.4.3.1	Povrchové napětí nevodných kapalných směsí	6-41
	<i>Macleodova a Sudgenova metoda</i>	6-41
6.4.3.2	Povrchové napětí vodných roztoků	6-41
6.4.4	Zdroje dat	6-42
6.5	Literatura	6-42
<b>7</b>	<b>Aktivitní koeficienty ve směsích neelektrolytů</b>	<b>7-1</b>
7.1	Úvod	7-1
7.2	Odhadové metody	7-3
	<i>Modifikovaná metoda UNIFAC</i>	7-4
7.3	Příklady použití metody UNIFAC	7-20
7.4	Zdroje dat	7-26
7.5	Literatura	7-26
<b>8</b>	<b>Veličiny řídící distribuci látky v prostředí</b>	<b>8-1</b>
8.1	Rozdělovací koeficient látky v systému oktanol - voda	8-1
8.1.1	Úvod	8-1
8.1.2	Odhadové metody	8-3
	<i>Meylanova a Howardova příspěvková metoda</i>	8-3
	<i>Výpočet <math>K_{ow}</math> z odhadnutých aktivitních koeficientů</i>	8-9
8.1.3	Zdroje dat	8-11
8.2	Rozpustnost organických látek ve vodě	8-11
8.2.1	Úvod	8-11
8.2.2	Odhadové metody	8-12
	<i>Metody vycházející z odhadnutých aktivitních koeficientů</i>	8-13
	<i>Meylanova a Howardova korelační rovnice mezi rozpustností a <math>K_{ow}</math></i>	8-14
	<i>Wakitova příspěvková metoda</i>	8-17